

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского»

УТВЕРЖДЕНО
решением ученого совета ННГУ
протокол от " " _____ 2022 г. №

Рабочая программа дисциплины
Актуальные проблемы кристаллографии и теория
псевдосимметрии

Уровень высшего образования
Подготовка научных и научно-педагогических кадров

Программа аспирантуры
1.3.8 «Физика конденсированного состояния»

Научная специальность
03.06.01 ФИЗИКА И АСТРОНОМИЯ

Форма обучения
Очная

Нижний Новгород
2022 год

1. Место и цели дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина «Актуальные проблемы кристаллографии и теория псевдосимметрии» относится к вариативной части ОПОП, является факультативной дисциплиной по выбору и изучается на 2 году обучения в 4 семестре.

Целями освоения дисциплины являются:

Дисциплина «Теория псевдосимметрии» будет полезна аспирантам, область научных интересов которых включает изучение атомной структуры кристаллов. Данный курс будет интересен как химикам, занимающимся синтезом и описанием новых органических, металлоорганических и неорганических кристаллов, так и физикам, изучающим структурнозависимые физические свойства кристаллов. Курс предполагает углубленное изучение теории симметрии кристаллов и кристаллохимии. Дополнение классической теории симметрии понятием «псевдосимметрия» позволяет существенно обогатить исследовательский инструментарий кристаллохимического описания атомной структуры кристалла. Таким образом, дисциплину «Теория псевдосимметрии» можно рассматривать как продолжение курсов «Кристаллография» и «Кристаллохимия».

Освоение курса «Теория псевдосимметрии» опирается на знания, умения, навыки и компетенции, сформированные на двух предшествующих уровнях образования. Прежде всего, речь идет об освоении основных методов исследования атомной структуры кристалла, способах и средствах получения, хранения, переработки кристаллографической информации. У обучаемых формируется умение самостоятельно формулировать цели и задачи научного исследования, решать поставленные задачи с помощью современных исследовательских методов с использованием отечественного и зарубежного опыта. Приобретается опыт использования базовых теоретических знаний и практических навыков и умений в научных и научно-прикладных исследованиях.

3. Структура и содержание дисциплины.

Объем дисциплины (модуля) составляет всего - 36 часов, из которых 36 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (занятия лекционного типа – 18 часа, 18 часа – занятия семинарского типа).

Таблица 2

Структура дисциплины

| Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины, | Всего (часы) | В том числе | |
|--|--------------|--|------------------------|
| | | Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них | Самостоятельная работа |

| форма промежуточной аттестации по дисциплине | | Занятия лекционного типа | Занятия семинарского типа | Занятия лабораторного типа | Всего | |
|--|-------|--------------------------|---------------------------|----------------------------|-------|----|
| | Очное | | | | | |
| Группы точечной симметрии | 17 | 3 | | | 3 | 14 |
| Групп пространственной симметрии | 17 | 3 | | | 3 | 14 |
| Псевдосимметрия в природе | 20 | 6 | | | 6 | 14 |
| Методы количественной оценки псевдосимметрии | 20 | 6 | | | 6 | 14 |
| Современные подходы к кристаллохимическому описанию координационных соединений | 32 | | 18 | | 18 | 14 |
| В т.ч.текущий контроль | 2 | | | | | |
| Промежуточная аттестация - зачет | | | | | | |

Таблица 3

Содержание дисциплины

| №П/п | Наименование раздела дисциплины | Содержание раздела | Форма проведения занятий | Форма текущего контроля |
|------|----------------------------------|--|--------------------------|-------------------------------|
| 1а | Группы точечной симметрии | Теория симметрии (введение); группы симметрии разной размерности; точечная симметрия; | Лекционные | текущий контроль успеваемости |
| 1б | Групп пространственной симметрии | Решетки Браве; Элементы симметрии в кристаллическом пространстве; пространственная симметрия кристаллов; | Лекционные | текущий контроль успеваемости |
| 1в | Псевдосимметрия в природе | Понятие псевдосимметрии, псевдосимметрия кристаллов; виды псевдосимметрии кристаллов; влияние псевдосимметрии кристалла на дифракционную картину; особенности рентгеноструктурного | Лекционные | текущий контроль успеваемости |

| | | | | |
|----|---|--|------------------------|-------------------------------------|
| | | анализа псевдосимметричных кристаллов; псевдосимметрия и физические свойства кристалла; псевдосимметрия в живой природе | | |
| 1г | Методы количественной оценки псевдосимметрии | Обзор методы количественного описания псевдосимметрии кристаллов; | Лекционные | текущий контроль успеваемости |
| 1д | Современные подходы к кристаллохимическому описанию координационных соединений | Обзор методов современного кристаллохимического описания координационных соединений; программное обеспечение ЭВМ, используемое для исследования псевдосимметрии кристаллов и кристаллохимического анализа | Лабораторные работы | Письменные отчеты |

4. Формы организации и контроля самостоятельной работы обучающихся

Самостоятельная работа обучающихся предполагает изучение конспектов лекций, выделенных разделов основной литературы, а также дополнительной литературы, подготовку устного доклада (публичного выступления), подготовку к промежуточной аттестации.

Перечень основной и дополнительной литературы для самостоятельного изучения приведен в п. 7 настоящей Рабочей программы дисциплины.

Контрольные вопросы для промежуточной аттестации, примерные темы для устного доклада (публичного выступления) приведены в п. 6.4 настоящей Рабочей программы дисциплины.

5. Фонд оценочных средств для аттестации по дисциплине

5.1. Критерии и процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине.

При выполнении всех работ учитываются следующие **основные критерии**:

– уровень теоретических знаний (подразумевается не только формальное воспроизведение информации, но и понимание предмета, которое подтверждается правильными ответами на дополнительные, уточняющие вопросы, заданные экзаменаторами);

- умение использовать теоретические знания при анализе конкретных проблем, ситуаций;
- качество изложения материала, то есть обоснованность, четкость, логичность ответа, а также его полнота (то есть содержательность, не исключающая лаконичности);
- способность устанавливать внутри- и межпредметные связи,
- оригинальность мышления, знакомство с дополнительной литературой и другие факторы.

Описание шкалы оценивания на промежуточной аттестации в форме экзамена

Описание шкалы оценивания на промежуточной аттестации в форме зачета

| Оценка | Уровень подготовленности, характеризуемый оценкой |
|-------------------|--|
| <i>Зачтено</i> | владение программным материалом, понимание сущности рассматриваемых процессов и явлений, умение самостоятельно обозначить проблемные ситуации в организации научных исследований, способность критически анализировать и сравнивать существующие подходы и методы к оценке результативности научной деятельности, свободное владение источниками, умение четко и ясно излагать результаты собственной работы, следовать нормам, принятым в научных дискуссиях. |
| <i>Не зачтено</i> | непонимание смысла ключевых проблем, недостаточное владение науковедческой терминологией, неумение самостоятельно обозначить проблемные ситуации, неспособность анализировать и сравнивать существующие концепции, подходы и методы, неумение ясно излагать результаты собственной работы, следовать нормам, принятым в научных дискуссиях. |

5.2. Примеры типовых контрольных заданий или иных материалов, используемых для оценивания результатов обучения по дисциплине

5.2.1. При проведении зачета обучающимся предлагаются следующие контрольные вопросы, охватывающие программу дисциплины «Актуальные проблемы теории конденсированного состояния»:

Задание №1. Провести анализ возможного повышения симметрии в кристаллах структурного типа NaCl.

Задание №2. Определить федоровские надгруппы групп симметрии моноклинной сингонии.

Задание №3. Используя точечную модель атомов оценить степень инвариантности электронной плотности кристаллов структурного типа NaCl (по выбору преподавателя) относительно различных операторов преобразования.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины.

а) основная литература:

- Задачи по кристаллографии: учеб. пособие для вузов по физ. и хим. специальностям./Головачев В. П., Сафьянов Ю. Н., Чупрунов Е. В., Фадеев М. А., Хохлов А.

Ф. - М.: Физматлит, 2003. - 208 с. [<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=59115&DB=1>]; 10 шт.

- Чупрунов Е. В., Хохлов А. Ф., Фадеев М. А. - Основы кристаллографии: учеб. для вузов. - М.: Физматлит, 2004. - 500 с. [<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=59410&DB=1>]; 3 шт.

- Чупрунов Е. В. - Симметрия и псевдосимметрия кристаллов. - Н. Новгород: Изд-во ННГУ, 2015. - 658 с. [<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=467290&DB=1>]; 15 шт.

- Сомов Н.В. Псевдосимметрия кристаллов/Учебное пособие / Под редакцией проф. Е.В. Чупрунова. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет. 2014. С. 62

б) дополнительная литература:

- Псевдосимметрия в живой природе: монография. /Гелашвили Д. Б., Чупрунов Е. В., Сомов Н. В., Марычев М. О., Нижегородцев А. А., Маркелов И. Н., Якимов В. Н. - Н. Новгород: Изд-во ННГУ, 2016. - 363 с. [<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=489390&DB=1>]; 3 шт.

- Сомов Н. В. Расчетные методы исследования Федоровской псевдосимметрии кристаллов: дис. канд. физ.-мат. наук : 01.04.07. - Н. Новгород, 2011. - 170 с.

[<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=413921&DB=1>], 1 шт.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы

- Кристаллохимический комплекс программ **PseudoSymmetry** для исследования псевдосимметрии кристаллов. <http://phys.unn.ru/ps/> (Дата обращения 09.02.2018)

- Кристаллографический сервер Бильбао. <http://www.cryst.ehu.es> (Дата обращения 09.02.2018)

- Международный союз кристаллографов. <http://iucr.org> (Дата обращения 09.02.2018)

- База данных неорганических кристаллов Inorganic Crystal Structure Database (ICSD).

- База данных органически кристаллов Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC).

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины

- помещения для проведения занятий: лекционного типа, семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для хранения и профилактического обслуживания оборудования и помещения для самостоятельной работы обучающихся, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ННГУ.
- лицензионное программное обеспечение Inorganic Crystal Structure Database (ICSD), Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC);

Рабочая программа учебной дисциплины составлена в соответствии с учебным планом, Положением о подготовке научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре) (Постановление Правительства РФ от 30.11.2021 № 2122), Федеральными государственными требованиями к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре) (Приказ Минобрнауки РФ от 20.10.2021 № 951).

Автор (ы) _____ Сомов Н.В.

Рецензент (ы) _____

Заведующий кафедрой _____ Чупрунов Е.В.

Программа одобрена на заседании методической комиссии физического факультета от _____
_____ 2022 года, протокол № б/н